

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： エネルギー変換計算科学による相界面光誘起素過程の設計
2. 研究代表者： 山下 晃一（国立大学法人 東京大学 工学系研究科 教授）
3. 中間評価結果

本研究課題は太陽光エネルギーの利用拡大に向け、相界面で光誘起により起こるエキシトンの生成と解離、および生成したキャリアの緩和過程を理論化学・計算科学の観点からとらえ、その過程の制御と最適化をし、計算科学と実験実証の両面よりアプローチして高機能相界面を探索・創出することを目標としている。

本課題の計算科学に関する研究についてはその学問的水準は高く、有機半導体界面に関する分光学的な実験アプローチと併せ、これまでエキシトンの生成・解離および生成したキャリアの緩和過程に着目することで、ホットプロセスがキャリア輸送の主要な経路となることを明らかにするという重要な成果を出しており、着実な研究進展が認められる。しかしながら、当初計画した一部の実験的研究項目は今後の見通しが明瞭ではないと考えている。残りの研究期間を有効に活用し、また成果を最大化することを目指して、これらの研究項目の進め方を検討のうえ研究チーム全体を最適化すべきと考える。

本研究課題で得られる成果を高効率な太陽電池へ展開することができれば、産業界へのインパクトも大きいと考えられる。理論化学と実験実証の両輪で確実な成果を出し、太陽電池の高効率化への指針を計算科学的アプローチから示すことで、科学、及び科学技術イノベーションに貢献することを期待する。